

тельному уменьшению параметров $a = 3.870 \text{ \AA}$, $c = 7.636 \text{ \AA}$, что связано с размерным эффектом ($r_{\text{Fe}^{3+}} / r_{\text{Fe}^{4+}} = 0.785 / 0.725 \text{ \AA}$, к.ч. = 6 и $r_{\text{Co}^{3+}} / r_{\text{Co}^{4+}} = 0.61 / 0.53 \text{ \AA}$, к.ч. = 6)[1].

Методом термогравиметрического анализа для незамещенного оксида $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$ получена зависимость кислородной нестехиометрии (δ) от температуры $T = 25 - 1000 \text{ }^\circ\text{C}$ на воздухе. Абсолютное содержание кислорода ($5+\delta$) в образце составило 5.02.

Температурная зависимость относительного линейного расширения сложных оксидов была измерена на dilatометре Netzsch DIL 402C в интервале температур $25-1000 \text{ }^\circ\text{C}$ на воздухе. Из полученных данных были рассчитаны коэффициенты термического расширения. Для состава $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$ значение КТР составило $13.7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. С введением кобальта в образец значения коэффициентов термического расширения незначительно возрастают.

1. Shannon R.D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides // Acta Cryst. 1976. V. 32. P. 751–767.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ФАЗ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ Gd – Sr – Fe – O

Зубаткина Л.В., Петрова А.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

За последнее десятилетие общество стало потреблять значительно большее количество электроэнергии. Все возрастающие потребности стали причиной развития химии твердого тела, основными задачами которой являются синтез твердых веществ, изучение их физико-химических свойств, реакций с их участием и в конечном итоге создание материалов с заранее заданными свойствами.

Поэтому целью настоящей работы является исследование фазовых равновесий в системе Gd-Sr-Fe-O, а также изучение кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии и физико-химических свойств индивидуальных соединений, образующихся в данной системе.

Синтез образцов проводили по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе

«FullProf 2008». Кислородную нестехиометрию (δ) сложных оксидов $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x=0-0.3$), $\text{Sr}_{2-y}\text{Gd}_y\text{FeO}_{4\pm\delta}$ ($y=0.85$) и $\text{Sr}_{3-z}\text{Gd}_z\text{Fe}_2\text{O}_{7-\delta}$ ($z=1.9$) изучали методом термогравиметрического анализа (ТГА) как функцию температуры (в интервале 25 – 1100°C) на воздухе.

Согласно результатам РФА закаленных образцов в системе Gd-Sr-Fe-O при 1100 °C на воздухе образуются три типа твердых растворов: $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$, $\text{Sr}_{2-y}\text{Gd}_y\text{FeO}_{4\pm\delta}$ и $\text{Sr}_{3-z}\text{Gd}_z\text{Fe}_2\text{O}_{7-\delta}$.

Согласно результатам РФА закаленных образцов в системе Gd-Sr-Fe-O при 1100°C на воздухе образуются три типа твердых растворов. Кристаллическая структура феррита стронция $\text{SrFeO}_{3-\delta}$ описывается в тетрагональной ячейке (пр.гр. $I4/mmm$), а $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($0.05 \leq x \leq 0.30$) - в кубической (пр. гр. $Pm3m$). Рентгенограммы образцов $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($0.8 \leq x \leq 1.0$), подобно $\text{GdFeO}_{3-\delta}$, имеют орторомбическую структуру (пр. гр. $Pbnm$). Образец с соотношением элементов в А и В подрешетке 2 к 1: $\text{Sr}_{1.15}\text{Gd}_{0.85}\text{FeO}_{4-\delta}$ (пр.гр. $I4/mmm$). Ферриты $\text{Sr}_{3-z}\text{Gd}_z\text{Fe}_2\text{O}_{7-\delta}$ ($0 \leq z \leq 0.30$) имеют тетрагональную ячейку (пр. гр. $I4/mmm$). Образец состава $\text{Sr}_{1.1}\text{Gd}_{1.9}\text{Fe}_2\text{O}_{7-\delta}$ имеет тетрагональную структуру (пр. гр. $P42/mnm$).

Для всех однофазных образцов методом термогравиметрического анализа (ТГА) была изучена кислородная нестехиометрия (δ), как функция температуры на воздухе. Абсолютное значение кислородного дефицита определяли методами йодометрического титрования и полного восстановления образцов в токе водорода.

По результатам РФА всех исследуемых образцов, закаленных на комнатную температуру, предложен изобарно-изотермический разрез диаграммы состояния системы Gd-Sr-Fe-O при 1100 °C на воздухе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук № МК-6159.2016.3.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА, КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ И ОБЩАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ

$\text{SmBaCo}_{1.4}\text{Me}_{0.6}\text{O}_{6-\delta}$ (Me = Ni, Cu)

Зайкин Е.И., Мычкинко М.Ю., Волкова Н.Е.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сложные оксиды на основе кобальтитов самария-бария со структурой слоистого перовскита являются перспективными материалами для использования их в качестве катодов для средне- и высокотемператур-